

## **INTISARI**

### **Mempelajari Pembentukan Kompleks Antara Tautomer Guanin dengan Senyawa Metabolit Aktif Daidzein Menggunakan Metode Semiempiris (AM1)**

**Oleh:**

**Annisa Iskha (BP 1210413018)**

**Emdeniz, MS\*, Imelda, M.Si\***

**\*Pembimbing**

Telah dilakukan analisis pembentukan kompleks antara senyawa metabolit aktif dari flavonoid daidzein dengan guanin. Pada penelitian ini dilakukan analisis tautomer guanin yang paling mungkin terbentuk dan paling stabil serta kompleks yang paling mungkin terbentuk antara senyawa metabolit aktif flavonoid daidzein dengan guanin. Analisa dilakukan dengan menggunakan metode semiempiris austin model 1 (AM1). Hasilnya menunjukkan bahwa bentuk tautomer guanin yang paling stabil dan paling mudah terbentuk berdasarkan energi total dan panas pembentukannya adalah guanin 1. Berdasarkan energi totalnya dan panas pembentukan kompleks guanin 1-isoflavon diol epoksida dan guanin 1-isoflavon diketon paling stabil dan paling mudah terbentuk. Sedangkan untuk kelarutannya kompleks guanin 5-isoflavon diol epoksida dan guanin 2-isoflavon diketon paling sulit larut. Berdasarkan transfer elektron, kompleks guanin 10-isoflavon diol epoksida dan kompleks guanin 10-isoflavon diketon memiliki jumlah transfer elektron terbanyak dibandingkan bentuk kompleks lainnya. Untuk panjang ikatan didalam kompleks, kompleks guanin 10-isoflavon diol epoksida dan kompleks guanin 4-isoflavon diketon memiliki nilai panjang ikatan terkecil

**Kata kunci:** tautomer guanin, flavonoid, semiempiris (AM1), daidzein

## ABSTRACT

### Studying Complex Formation Between Guanine Tautomers With Active Metabolic Compounds Daidzein Using Semiempirical Austin Model 1 (AM1) Method

By:

Annisa Iskha (BP 1210413018)

Emdeniz, MS\*, Imelda, M.Si\*

\*Supervisor

Formation analysis of the complex has been made between the active metabolites compounds of flavonoids daidzein with guanine. This research has been conducted to analysis the guanine tautomers that are most likely formed and most stable as well as the most complex formed between the active metabolite compounds of flavonoid daidzein with guanine. The analysis using the semiempirical austin model 1(AM1) method. The results show that formation of the most stable guanine tautomer and most formed based on total energy and heat of formation is the guanine 1. Based on the total energy and the heat of formation, guanine 1-isoflavone diol epoxide complex and guanine 1-isoflavone diketone complex are the most stable and most easily formed complex. Based on solubility guanine 5-isoflavone diol epoxide complex and guanin 2-isoflavone diketone complex are the most difficult dissolved. Based on electron transfer guanine 10-isoflavone diol epoxide and guanine 10-isoflavone diketone complex have most electron transfer. Based on bond length, guanine 10-isoflavone diol epoxide and guanine 4-isoflavone diketone have short bond length.

**Keywords:** tautomeric guanine, flavonoids, semiempirical AM1, daidzein